

В рамках данного направления перспективным представляется расширение рядов производных хинолин-2-карбоновых кислот за счет варьирования используемых нуклеофильных регентов и исходных метилкетонов, а также изучение биологической активности целевых продуктов.

1. Земцова М.Н. Синтез и противовирусная активность некоторых производных хинолинового ряда // Химико-фармацевтический журнал. 2011. Т. 45, № 5. С. 9–11.

2. Дубровин А.Н. и др. Поиск биологически активных веществ среди 2-замещенных хинолин-4-карбоновых кислот // Теоретические и прикладные аспекты современной науки. Белгород : ИП Петрова, 2014. Ч. 2. С. 37–39.

3. Козьминых В.О., Кириллова Е.А., Гончаров В.И. и др. Трехкомпонентная тандемная гетероциклизация ацетофенона с диэтилоксалатом и *m*-аминофенолом – новый метод получения 7-гидрокси-4-фенилхинолин-2-карбоновой кислоты // Вестник Оренбургского гос. университета. 2008. № 4(85). С 101–107.

## НЕЭМПИРИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ МОЛЕКУЛЫ АПИГЕНИНА

*Жуматаева А.Р.<sup>(1)</sup>, Жанымханова П.Ж.<sup>(1)</sup>, Абуляисова Л.К.<sup>(2)</sup>,  
Мукушева Г.К.<sup>(1)</sup>, Адекенов С.М.<sup>(1)</sup>*

<sup>(1)</sup> АО Международный научно-производственный холдинг  
«Фитохимия»

100009, г. Караганда, ул. М. Газалиева, д. 4

<sup>(2)</sup> Карагандинский государственный университет  
100028, г. Караганда, ул. Университетская, д. 28

Апигенин относится к классу полифенольных соединений и входит в группу флавоноидов. Это соединение широко применяется в медицине и обладает рядом фармакологических свойств – спазмолитическим, противовоспалительным, антиоксидантным, а также противораковым действием. Поэтому актуальным является синтез биологически активных соединений на основе флавоноида апигенина. В связи с этим для изучения реакционной способности апигенина нами проведены квантово-химические расчеты методом Хартри-Фока в базисе 6-31G(d) с помощью программы Gaussian.

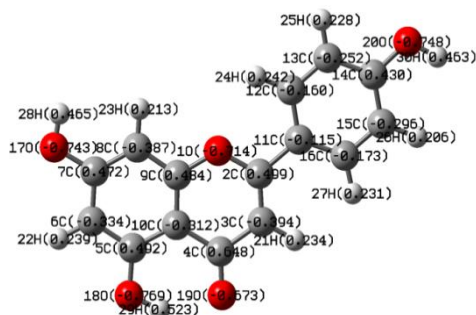
Рассчитанные энергетические характеристики молекулы апигенина представлены в таблице.

### Энергетические параметры граничных орбиталей апигенина

ВЗМО, эВ	НВМО, эВ	Жесткость $\eta$ , эВ	Энергетическая щель, эВ
-8,8032	1,9560	5,3796	10,7592

Исходя из положительного значения энергии НВМО, можно предположить, что молекула апигенина проявляет нуклеофильные свойства и поскольку энергетическая щель между ВЗМО и НВМО превышает 1 эВ, то исследуемый флавоноид можно рассматривать как жесткий реагент, с жесткостью  $\eta = 5,3796$  эВ.

Для определения положения реакционных центров в молекуле апигенина произведен расчет малликовенского распределения заряда на атомах.



Результаты расчетов показали, что предпочтительными центрами для атаки электрофильными реагентами являются атомы C3, C6, C8, т.е. атомы в *орто*- и *пара*- положении по отношению к функциональным группам  $\text{OCH}_3$  и  $\text{OH}$ . Положительный заряд сконцентрирован на атомах C2, C4, C5, C7, C9 и C14, что объясняется присутствием гидроксид-, метокси-, кето-групп и циклического кислорода O1.

Таким образом, на основании полученных данных можно констатировать, что флавоноид апигенин проявляет нуклеофильные свойства и является достаточно жестким реагентом с основными реакционными центрами на атомах C3, C6, C8.